Трёхэлектронная связь – интересные факты и день рождения.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

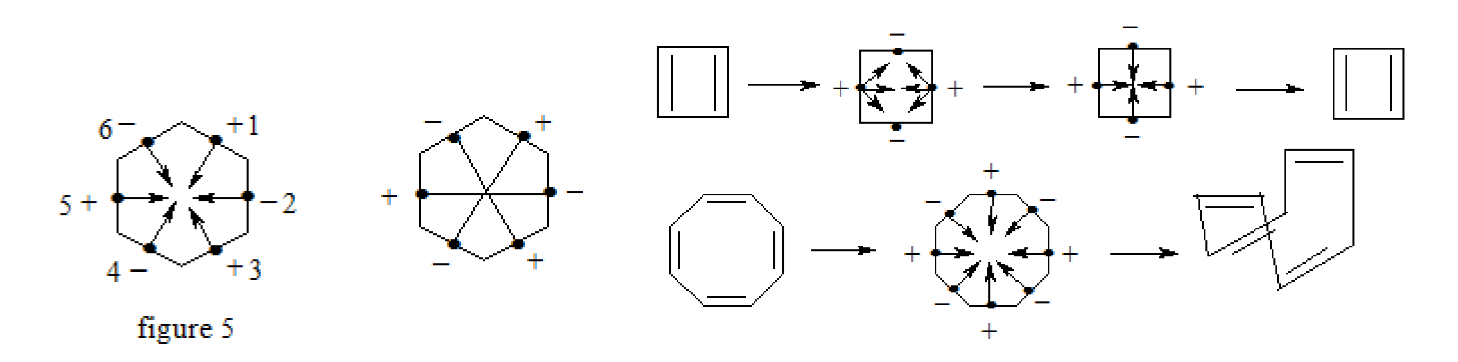
Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Я пришел к идее трёхэлектронной связи не изучая бензол, а работая над формулой кислорода. Парамагнетизм кислорода буквально не давал мне спать... Это было в Кировограде в 1995 году. Год назад я закончил университет, только устроился преподавателем органической химии в университет, и только что женился.

Метод МО легко объясняет парамагнетизм кислорода чисто схематически. Но распределение электронной плотности в молекуле должно быть стационарным и усредненным во времени. Поэтому, можно попытаться изобразить строение молекулы классическим языком химии: с помощью точек (электронов), то есть формул Льюиса. Но, этого нельзя сделать без трёхэлектронной связи с кратностью 1,5, так как молекула кислорода имеет порядок связи равный 2 (это экспериментальный факт, инфракрасные спектры).

Однажды летом 1995 года, я ясно осознал такой простой факт: формулу кислорода нельзя записать, если не принять, что существует реальная трёхэлектронная связь с нормальной кратностью, то есть 1,5. Я сразу понял, что если трёхэлектронная связь существует в кислороде, то она должна существовать и в бензоле. Значит, должно быть простое и понятное объяснение ароматичности и антиароматичности, причем наглядное.

Дрожащими руками я быстро нарисовал формулу бензола с трёхэлектронными связями и сразу увидел, что спины центральных электронов направлены в противоположную сторону. Я молниеносно нарисовал восьмиугольник циклооктатетраена и убедился, что все работает: центральные электроны имеют спины в одном направлении! Смотри схемы [1], там же есть и более полная работа по теории трёхэлектронной связи.



Далее шла напряженная работа продолжавшаяся более 10 лет. Естественно, я вычислил кратности и энергии различных химических связей, рассчитал энергию делокализации и применил новый тип химической связи в различных структурах. Время шло...

Собственно, необходимо уточнить, что все это время я пытался опровергнуть теорию трёхэлектронной связи (с кратностью 1,5). То есть, я искал проблемы, которым не мог сразу найти разумное объяснение с помощью трёхэлектронной связи... И я думал... И всегда, через некоторое время, находил изящное и красивое решение задачи. Спустя много лет я понял, что невозможно найти корректную задачу, где трёхэлектронная связь была бы бессильна.

Я размышлял о строении пятичленных ароматических циклов почти 2 года, но результат получился отличный [1, страница 27].

X = O, S, NH

За много лет я прошёл практически всю органическую химию, да и неорганическую химию... Так было разработано “Строение молекулы бензола на основе трёхэлектронной связи”.

Далее, я начал искать теоретическое обоснование трёхэлектронной связи. Здесь дела обстояли гораздо хуже, так как в течение многих лет не удавалось найти физически строгое теоретическое обоснование. Мне не нравилось ничего, о чем я мог подумать. Вообще. Но, я не унывал. Более того, я понял, что мне может помочь только физика. На квантовую химию у меня были минимальные надежды. Спустя много лет выяснилось, что именно физика дала теоретически правильное обоснование трёхэлектронной связи. В целом теоретическое обоснование заняло более 10 лет... Долго.

Кстати, оказывается, у теории трёхэлектронной связи есть свой день рождения.

21 августа 2002 года – день рождения трёхэлектронной связи.

Разбирая старые записи (черновики) случайно наткнулся на печатный вариант работы “Строение молекулы бензола на основе трёхэлектронной связи”. Конечно, это украинская версия (позже я перевел на русский язык), 21 страница, напечатанная 21 августа 2002 года. Эта версия несколько отличается от опубликованной (окончательная версия - 24 июля 2009 года): английская версия [2], украинская версия [3].

Версия 2002 года завершается меньшим количеством формул с трёхэлектронной связью: только нафталин, антрацен, фенантрен, коронен, 18-аннулен, пиридин, фуран, тиофен, пирол, карбоксилат-анион, нитросоединения, нитрат-анион, карбонат-анион, озон и кислород.

Позже я добавил еще формулы различных веществ (но это не принципиальное дополнение). И самое главное, позже я добавил описание молекулы мочевины, кстати, нашел эту печатную версию (украинский язык, 27 страниц), дата окончательной версии - 24 июля 2009 года (данная версия опубликована).

Здесь нужно объяснить. Рукописный вариант работы (на украинском языке) был готов в марте 2001 года. Теорией трёхэлектронной связи (бензол) я занимаюсь с июля 1995 года. Но, при наборе текста на компьютере, я изменил первоначальный план изложения, и поэтому окончательная версия — 21 августа 2002 года.

После 2002 года я пытался найти теоретическое обоснование трёхэлектронной связи (с кратностью 1,5), но безуспешно. Поэтому с 2002 по 2009 год я постоянно думал об этой работе и пытался найти теоретическое обоснование. В результате размышлений появилась работа [4]: "Краткий анализ химических связей". Так как я тоже работал с различными химическими связями. Конечно, до 2002 года я проверял уравнение $y = a + b/x + c/x^2$ на различных химических связях, но доработал как работу только к 2009 году (ссылки и т.п.). В версии 2002 года не было двух таблиц с коэффициентами (для остальных химических связей).

На самом деле я использовал эту функцию $y = a + b/x + c/x^2$ по определенной причине. Еще учась в университете на химическом факультете, я был очарован сходством химической связи и сильного взаимодействия (при изучении физики). Между химической связью и сильным взаимодействием есть нечто подобное. Поэтому я решил, что если кулоновское отталкивание каким-то образом будет преодолено, то логично предположить, что неизвестная "сила" будет зависеть от расстояния обратно пропорционально кубу:

$$F = f\,(1/r^3)$$

Но, поскольку такой силы в природе не существует, я в работе указал, что была выбрана функция ($y = a + b/x + c/x^2$), так как она хорошо описывает все виды химических связей (что верно).

Я подозревал, что пространство-время на квантовом уровне может быть немного сложнее, чем мы себе представляем, и поэтому эта функция ($y = a + b/x + c/x^2$) может отражать фундаментальные свойства пространства-времени.

Конечно, можно представить бесконечное количество различных математических функций, которые будут корректно описывать химическую связь (я это практиковал), но правильным будет только $y = a + b/x + c/x^2$, по причине указанной выше.

Кстати, вот украинская версия работы от 21 августа 2002 года [5]. Эта версия работы (21 августа 2002) была изменена на финальную только в июле 2009 года. Окончательный и опубликованный вариант датирован 24 июля 2009 года.

А вот английский перевод версии 2002 года [6] (перевод дорабатывался постепенно, это перевод образца апрель 2009 года).

Будущее теории трёхэлектронной связи — это развитие и углубление нашего понимания химической связи и структуры молекул, а также распространение на химию и физику, и все более сильное влияние на жизнь людей (новые лекарства, новые материалы, виртуальный синтез и т.п.).

1. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Review. Benzene on the Basis of the Three-Electron Bond. (The Pauli Exclusion Principle, Heisenberg's Uncertainty Principle and Chemical Bond). SSRN Electronic Journal, 31 Dec 2018. Pages 8, 9. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065288

2. Bezverkhniy V. D. Structure of the Benzene Molecule on the Basis of the Three-Electron Bond. SSRN Electronic Journal, 31 Dec 2018. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065241

3. Bezverkhniy V. D. Будова молекули бензолу на основі трьохелектронного зв'язку. (Structure of the Benzene Molecule on the Basis of the Three-Electron Bond.). SSRN Electronic Journal, 27 Jul 2022. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4152958

4. Bezverkhniy V. D. A short analysis of chemical bonds. SSRN Electronic Journal, 2 Jan 2019. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065253

5. Bezverkhniy V. D. Будова молекули бензолу на основі трьохелектронного зв'язку (21 серпня 2002). (Structure of the Benzene Molecule on the Basis of the Three-Electron Bond). SSRN Electronic Journal, 6 Dec 2022. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4266439

6. Bezverkhniy V. D. Structure of the Benzene Molecule on the Basis of the Three-Electron Bond. SSRN Electronic Journal, 6 Dec 2022. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4266437